ЖЭТФ, 1997, том 111, вып. 3, стр. 831–837

КВАНТОВОЕ КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ БОЛЬЦМАНА С УЧЕТОМ РЕЗОНАНСНОГО ОБМЕНА ВОЗБУЖДЕНИЯМИ

Т. Л. Андреева, П. Л. Рубин

Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
117924, Москва, Россия

Поступила в редакцию 8 июля 1996 г.

Приведен вывод квантового уравнения Больцмана для тождественных частиц с внутренними степенями свободы. Показано, что недиагональный по внутренним степеням свободы член уравнения содержит полюсное (по энергии) слагаемое, отсутствующее в наиболее часто используемом варианте кинетического уравнения — так называемом уравнении Вальдмана–Снайдера. Проанализированы физические условия, ответственные за возникновение полюсного члена в квантовом кинетическом уравнении.

1. ВВЕДЕНИЕ

В задачах лазерной спектроскопии для прецизионных вычислений формы линий в газах необходимо иметь квантовое кинетическое уравнение Больцмана с учетом внутренних степеней свободы частиц (уравнение для матрицы плотности). Форма спектральной линии определяется недиагональным по внутренним степеням свободы элементом матрицы плотности [1]. Такими степенями свободы могут быть электронные состояния атома как невырожденные, так и вырожденные по проекциям момента количества движения.

Особый интерес представляют газы, магнитный момент которых определяется только спином (S-состояния) и в которых магнитная поляризация, подобно форме линий в оптике, определяется недиагональным по спиновым переменным элементом матрицы плотности. В последние годы в связи с появившимися возможностями поляризовывать парамагнитные газы различными методами такие системы, называемые спин-поляризованными газами, активно изучаются (см., например, [2, 3]). Дело в том, что спиновая поляризация существенно влияет на макроскопические свойства квантовых газов и в определенных условиях допускает даже существование в них слабо затухающих спиновых волн [4, 5].

В настоящее время основой теоретического исследования спин-поляризованных газов служит кинетическое уравнение Вальдмана–Снайдера [6, 7], обобщенное на случай тождественных частиц [8], не содержащее полюсного члена. Отметим, что наличие полюсного члена в кинетическом уравнении Больцмана отмечалось в ряде работ [9–11], и оно приводит к ряду интересных физических эффектов. В частности, в оптической области спектра появляется дополнительный сдвиг линии, аномально зависящий от температуры газа [11], а в спин-поляризованных газах возникают спиновые волны [2–8, 10].

В недавней работе Мейеровича, Степанянца и Лалоэ [2] уравнение Вальдмана–Снайдера дополнено полюсным членом, однако этот член получен в третьем порядке по плотности газа, причем утверждается, что во втором порядке по плотности такой член не возникает. В настоящей работе будет показано, что на самом деле полюсный член в кинетическом уравнении возникает и в обычном для больцмановского уравнения втором порядке по плотности газа. Проанализированы физические условия возникновения полюсного члена. Показано, что полюсный член в кинетическом уравнении возникает, когда амплитуды рассеяния зависят от внутреннего состояния частиц. В частности, достаточно наличия двух процессов столкновения с разными амплитудами рассеяния для возникновения полюсного члена.

2. ВЫВОД УРАВНЕНИЯ ДЛЯ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ

Метод вывода в основе своей совпадает с использованным Снайдером [6], однако наше рассмотрение применимо и к вырожденной (как у Снайдера), и к невырожденной системам. Ради простоты частицы считаются бозонами (как нетрудно будет убедиться, результат от этого не зависит). Матрица плотности в координатном представлении имеет вид

$$\rho_{\alpha\alpha'}(x,x',t) = \langle \psi^+_{\alpha'}(x',t)\psi_\alpha(x,t)\rangle. \tag{1}$$

Здесь $\psi_\alpha(x,t)$ — волновая функция рассматриваемых частиц в представлении вторичного квантования (α — индекс внутреннего состояния); угловые скобки — символ квантово-статистического усреднения.

Вторично-квантованный гамильтониан системы имеет обычный вид:

$$\hat{H} = \int \psi^+_\mu(x)H^{(0)}\psi_\nu(x)dx + \frac{1}{2}\int \psi^+_\mu(y)\psi^+_\nu(x)U_{\mu\nu\sigma\theta}(x-y)\psi_\sigma(x)\psi_\theta(y)dx\,dy. \tag{2}$$

Здесь $H^{(0)}$ — одночастичный гамильтониан:

$$H^{(0)}\psi_\nu(x) = \left(-\frac{\Delta_x}{2m} + E_\nu\right)\psi_\nu(x),$$

где m — масса частицы, Δ — оператор Лапласа, E_ν — энергия внутреннего состояния, U — потенциал взаимодействия частиц с учетом их внутреннего состояния. Ради простоты принимается $\hbar = 1$. Из эрмитовости $\hat{H}$ и симметрии по отношению к перестановкам одинаковых частиц вытекают следующие свойства потенциала взаимодействия:

$$U^*_{\mu\nu\sigma\theta}(x) = U_{\theta\sigma\nu\mu}(x), \quad U_{\mu\nu\sigma\theta}(x) = U_{\nu\mu\theta\sigma}(-x). \tag{3}$$

Уравнения для одночастичной (1) и двухчастичной

$$\rho^{(2)}_{\alpha\beta\alpha'\beta'}(x,y,x',y') = \langle \psi^+_\alpha(x)\psi^+_\beta(y)\psi_{\alpha'}(x')\psi_{\beta'}(y')\rangle$$

матриц плотности имеют стандартный вид [9, 10]:

$$i\frac{\partial\rho_{\alpha\alpha'}(x,x',t)}{\partial t} = \left(-\frac{\Delta_x}{2m} + E_\alpha + \frac{\Delta_{x'}}{2m} - E_{\alpha'}\right)\rho_{\alpha\alpha'}(x,x',t) + \\ + I_{\alpha\alpha'}(x,x',t) - I^*_{\alpha'\alpha}(x',x,t), \tag{4}$$

$$i\frac{\partial\rho^{(2)}_{\tau_1\tau_2\tau_3\tau_4}(x_1,x_2,x_3,x_4)}{\partial t}=$$
$$=\left[\left(-\frac{\Delta_{x_3}}{2m}-\frac{\Delta_{x_1}}{2m}\right)+E_{\tau_3}+E_{\tau_4}-\left(-\frac{\Delta_{x_1}}{2m}-\frac{\Delta_{x_2}}{2m}+E_{\tau_1}+E_{\tau_2}\right)\right]\rho^{(2)}_{\tau_1\tau_2\tau_3\tau_4}(x_1,x_2,x_3,x_4)+$$
$$+U_{\tau_3\tau_4\gamma\beta}(x_3-x_4)\rho^{(2)}_{\tau_1\tau_2\gamma\beta}(x_1,x_2,x_3,x_4)-U_{\beta\gamma\tau_1\tau_2}(x_2-x_1)\rho^{(2)}_{\beta\gamma\tau_1\tau_2}(x_1,x_2,x_3,x_4), \qquad (5)$$

$I_{\alpha\alpha'}$ — интеграл столкновений:

$$I_{\alpha\alpha'}(x,x',t)=\int U_{\lambda\alpha\sigma\theta}(x-y)\rho^{(2)}_{\lambda\alpha\theta\sigma}(x',y,y,x)dy. \qquad (6)$$

По повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Здесь, как обычно, не учитываются тройные столкновения.

Для решения уравнения (6) необходимо задать асимптотический вид решения в области, где частицы практически не взаимодействуют друг с другом. Рецепт на этот случай хорошо известен [9]:

$$\rho^{(2)}_{\tau_1\tau_2\tau_3\tau_4}(x_1,x_2,x_3,x_4)=\left(1+\hat{P}\right)\rho_{\tau_3\tau_1}(x_3,x_1)\rho_{\tau_4\tau_2}(x_4,x_2).$$

Здесь $\hat{P}$ — оператор перестановки частиц $1\leftrightarrow 2$ или (что то же самое) $3\leftrightarrow 4$.

Полагая, как обычно в больцмановском приближении, столкновения локальными и переходя от матрицы плотности в координатном представлении к функции Вигнера [12], нетрудно получить следующее асимптотическое выражение для двухчастичной функции:

$$\rho_{\tau_3\tau_1}(x_3,x_1)\rho_{\tau_4\tau_2}(x_4,x_2)=$$
$$=\int dp'dp''f_{\tau_3\tau_1}(p')f_{\tau_4\tau_2}(p'')\exp i\left[\left(p'+p''\right)\left(R-R'\right)+\frac{(p'-p'')(r-r')}{2}\right]. \qquad (7)$$

Наряду с исходными переменными в правой части здесь использована следующая замена переменных:

$$r=x_3-x_4,\quad R=(x_3+x_4)/2,\quad r'=x_1-x_2,\quad R'=(x_1+x_2)/2,$$

которая позволяет естественным образом отделить движение центра инерции сталкивающихся частиц от их относительного движения.

Следующий этап вывода уравнения в работе Снайдера [6] выполнен кратко и в абстрактной операторной форме, что, по-видимому, явилось причиной некоторых неточностей в окончательном результате. Эту часть вывода мы изложим более подробно. Сначала используем очевидное тождество:

$$f_{\tau_3\tau_1}(p')f_{\tau_4\tau_2}(p'')=f_{\tau_3'\tau_1'}(p')f_{\tau_4'\tau_2'}(p'')\delta_{\tau_1\tau_1'}\delta_{\tau_2\tau_2'}\delta_{\tau_3\tau_3'}\delta_{\tau_4\tau_4'}.$$

При этом функция

$$\varphi\left(\tau_3',\tau_4',\frac{p'-p''}{2};\tau_3,\tau_4,r\right)=\delta_{\tau_3\tau_3'}\delta_{\tau_4\tau_4'}\exp\left(i\frac{p'-p''}{2}r\right)$$

представляет собой асимптотическое (на бесконечности) значение волновой функции задачи о столкновении двух частиц: $(p' - p'')/2$ — импульс относительного движения (приведенная масса — $m/2$), τ_3' и τ_4' — квантовые числа, а τ_3 и τ_4 — соответствующие переменные внутреннего состояния. Поясним это на примере частицы со спином, когда волновая функция внутреннего состояния представляет собой спиноры $\delta_{(1/2)\tau}$ и $\delta_{-(1/2)\tau}$, где $\tau = 1/2$ или $-1/2$.

В уравнении (4) группы переменных (r, R, τ_3, τ_4) и (r', R', τ_1, τ_2) разделяются, причем вторая группа переменных описывает движение, обращенное по времени. Можно считать, что операция обращения времени сводится к комплексному сопряжению волновой функции, поскольку даже в случае фермионов их пара составляет бозон.

Теперь нетрудно получить точное решение уравнения для двухчастичной матрицы плотности. Для этого в уравнении (7) достаточно заменить те множители, которые представляют собой асимптотические волновые функции задачи о рассеянии согласно (4), на соответствующие точные волновые функции ψ:

$$\varphi\left(\tau_3', \tau_4', \frac{p'-p''}{2}; \tau_3, \tau_4, r\right) \to \psi\left(\tau_3', \tau_4', \frac{p'-p''}{2}; \tau_3, \tau_4, r\right).$$

В результате выражение для двухчастичной функции принимает вид

$$\rho^{(2)}_{\tau_1\tau_2\tau_3\tau_4}(x_1, x_2, x_3, x_4) = 2\int dp'dp'' \exp\left[i(p'+p'')(R-R')\right] f_{\tau_3'\tau_1'}(p') f_{\tau_4'\tau_2'}(p'') \times$$
$$\times \exp(i\mathscr{E}_{\tau_1'\tau_2'\tau_3'\tau_4'} t)\psi\left(\tau_3', \tau_4', \frac{p'-p''}{2}; \tau_3, \tau_4, r\right)\psi^*\left(\tau_1', \tau_2', \frac{p'-p''}{2}; \tau_1, \tau_2, r'\right). \tag{8}$$

Здесь

$$\mathscr{E}_{\tau_1'\tau_2'\tau_3'\tau_4'} = E_{\tau_1'} + E_{\tau_2'} - E_{\tau_3'} - E_{\tau_4'}.$$

Отметим, что множитель 2 в правой части равенства — следствие симметризации волновой функции (здесь и далее ψ уже считается симметризованной).

Имея выражение для двухчастичной функции, нетрудно написать интеграл столкновений $I_{\alpha\alpha'}(x, x', t)$ (см. (6)). Удобно сразу записать его в вигнеровском представлении:

$$I_{\alpha\alpha'}(x, p, t) = \frac{2}{\pi^3}\int d\eta\, d\xi\, dp'dp'' U_{\lambda\alpha\theta\sigma}(\eta)\times$$
$$\times\psi\left(\tau_3', \tau_4', \frac{p'-p''}{2}; \theta, \sigma, \eta\right)\psi^*\left(\tau_1', \tau_2', \frac{p'-p''}{2}; \alpha', \lambda, \eta-2\xi\right) f_{\tau_3'\tau_1'}(p') f_{\tau_4'\tau_2'}(p'')\times$$
$$\times\exp\left\{i\left[\mathscr{E}_{\tau_1'\tau_2'\tau_3'\tau_4'} t + \xi(2p - p' - p'')\right]\right\}.$$

Дальнейшее преобразование этого выражения связано с использованием матричных элементов T-матрицы (ср. [6]). Для этой цели можно использовать уравнение Липпмана–Швингера [13]:

$$\psi\left(\tau_1', \tau_2', \frac{p'-p''}{2}; \alpha', \lambda, x\right) = \delta_{\tau_1'\alpha'}\delta_{\tau_2'\lambda}\exp\left[i\frac{p'-p''}{2}x\right] +$$
$$+G^{(+)}\left[\frac{(p'-p'')^2}{4m} + E_{\tau_1'} + E_{\tau_2'}\right]\hat{U}\psi\left(\tau_1', \tau_2', \frac{p'-p''}{2}; \alpha', \lambda, x\right).$$

Здесь $G^+(E) = (E - \hat{H}^{(0)})^{-1}$ — функция Грина невзаимодействующих частиц. С помощью этого равенства интеграл столкновений нетрудно выразить только через элементы T-матрицы [14]. Окончательный вид квантового кинетического уравнения Больцмана теперь может быть записан следующим образом:

$$\frac{\partial f_{\alpha\alpha'}(p)}{\partial t} + i(E_\alpha - E_{\alpha'})f_{\alpha\alpha'}(p) + \left(\frac{p}{m}\nabla\right) f_{\alpha\alpha'}(p) = -i\left[I_{\alpha\alpha'}(p) - I^*_{\alpha'\alpha}(p)\right]. \qquad (9)$$

Ради краткости в вигнеровской функции и интеграле столкновений опущены переменные x и t. Величина $I_{\alpha\alpha'}(p)$ выражается через элементы T-матрицы следующим образом:

$$I_{\alpha\alpha'}(p) = (2\pi)^3\hbar^2 \int dp' T_{\lambda\alpha\theta\sigma}\left(\frac{p'-p}{2}, \frac{p'-p}{2}\right) \exp\left[i\mathscr{E}_{\alpha'\lambda\theta\sigma}t\right] f_{\sigma\lambda}(p')f_{\theta\alpha'}(p) +$$

$$+(2\pi)^4\hbar^2 \int dp'dp''d\tilde{p}\delta(p+\tilde{p}-p'-p'') \exp\left[i\mathscr{E}_{\tau_1\tau_2\tau_3\tau_4}t\right] \times$$

$$\times \frac{T_{\alpha\lambda\tau_3\tau_4}\left[(p-\tilde{p})/2, (p'-p'')/2\right] T^*_{\alpha'\lambda\tau_1\tau_2}\left[(\tilde{p}-p)/2, (p'-p'')/2\right]}{(p'-p'')^2/4m + E_{\tau_1} + E_{\tau_2} - (\tilde{p}-p)^2/4m - E_{\alpha'} - E_\lambda - i0} f_{\tau_3\tau_1}(p')f_{\tau_4\tau_2}(p''). \qquad (10)$$

Сравнение этой формулы с соответствующим выражением в работе Снайдера [6] показывает, что совпадение достигается только в случае, когда T-матрица не зависит от внутренних квантовых чисел. В этом случае квадратичная по T часть интеграла столкновений содержит лишь член с δ-функцией по энергии, тогда как полюсной член (интеграл в смысле главного значения) исчезает.

3. ОБСУЖДЕНИЕ

Таким образом, из формулы (10) следует, что широко используемое кинетическое уравнение Вальдмана–Снайдера [6] должно быть дополнено полюсным членом. Этот член исчезает лишь в том случае, если T-матрица (и тем самым амплитуда рассеяния) не зависит от внутренних квантовых чисел сталкивающихся частиц. Именно такая ситуация была рассмотрена в [13], в результате чего авторы получили полюсный член только в третьем порядке по плотности газа.

В качестве примера рассмотрим следующие частные случаи. Пусть сначала T-матрица диагональна:

$$T_{\alpha\beta\alpha'\beta'} = T_{\alpha\beta}\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'}$$

и нет вырождения по энергии. Такое приближение обычно используется в теории уширения спектральных линий [1], хотя в действительности недиагональный член всегда существует и, более того, определяет вероятность перехода между невырожденными состояниями. Ради простоты рассмотрим пока только линейный по T член в кинетическом уравнении для недиагонального элемента вигнеровской функции распределения (9). В этом случае уравнение принимает очень простой вид:

$$\frac{\partial f_{\alpha\alpha'}(p)}{\partial t} + i(E_\alpha - E_{\alpha'})f_{\alpha\alpha'}(p) + \left(\frac{p}{m}\nabla\right) f_{\alpha\alpha'}(p) = -(\Gamma + i\Delta)f_{\alpha\alpha'}(p),$$

где

$$\Gamma + i\Delta = i(2\pi)^3\hbar^2 \times$$
$$\times \int dp' \left\{ \left[T_{\alpha\alpha}(\theta=0) f_{\alpha\alpha}(p') + T_{\alpha'\alpha}(\theta=0) f_{\alpha'\alpha'}(p') \right] \exp(i\Delta E t) - \right.$$
$$\left. - \left[T^*_{\alpha'\alpha'}(\theta=0) f_{\alpha'\alpha'}(p') + T^*_{\alpha\alpha'}(\theta=0) f_{\alpha\alpha}(p') \right] \exp(-i\Delta E t) \right\}.$$

Здесь $\Delta E = E_\alpha - E'_\alpha$, θ — угол рассеяния.

Это уравнение не совпадает с обычно используемым уравнением подобного типа (см. [1]). Тем самым связь ширины и сдвига спектральной линии с элементами T-матрицы (S-матрицы) отличается от обычно используемой [1]. Более общий случай с учетом квадратичного по T члена и недиагональности T-матрицы, когда возникает полюсный член в уравнении, представляет собой самостоятельную задачу и будет рассмотрен отдельно.

Второй случай относится к парамагнитному газу, когда уровни энергии, соответствующие различным проекциям спина, не вырождены. В этом случае наиболее простая модель сводится к учету лишь двух типов столкновений — столкновений частиц с параллельными и антипараллельными спинами, причем полный спин в обоих случаях сохраняется. С учетом этих двух процессов T-матрица (несимметризованная) имеет вид

$$T_{abcd} = T_d \delta_{ac}\delta_{bd} + T_e \sigma^{(i)}_{ac}\sigma^{(i)}_{bd}$$

(σ — матрицы Паули). При этом полюсный член в кинетическом уравнении (9) включает только мнимую часть интерференционного члена $T^*_e T_d$. Таким образом, только при (гипотетическом) тождественном совпадении амплитуд рассеяния частиц с параллельными и антипараллельными спинами ($T_d = T_e$) полюсного члена не будет.

Отметим, что полюсный член в кинетическом уравнении для матрицы плотности парамагнитного газа впервые появился в работе Силина [10]. Но его вид отличается от полученного нами (10). Кроме того, кинетическое уравнение с полюсным членом было получено в работе одного из авторов [11], в которой рассматривалось рассеяние частиц на бесструктурных примесях. Подробное обсуждение истории возникновения полюсного члена в кинетическом уравнении можно найти в работе [2]. Из результатов настоящей работы следует, что точку в этом обсуждении ставить рано.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант №96-02-17312-а).

Литература

1. Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков, *Возбуждение атомов и уширение спектральных линий*, Наука, Москва (1979).
2. A. E. Meyerovich, S. Stepaniants, and F. Laloë, Phys. Rev. B **52**, 6808 (1995).
3. N. P. Bigelow, P. J. Nacher, and M. Leduc, J. de Phys. **2**, 2159 (1992).
4. R. P. Bashkin and A. K. Meyerovich, Adv. Phys. **30**, 1 (1981).
5. Е. П. Башкин, УФН **148**, 433 (1986).
6. R. F. Snider, J. Chem. Phys. **32**, 1051 (1960).
7. L. Waldmann, Z. Naturforsch. **13a**, 609 (1958).

8. A. E. Meyerovich, Phys. Rev. B **39**, 9318 (1989).
9. Н. Н. Боголюбов, *Проблемы динамической теории в статистической физике*, Гостехиздат, Москва–Ленинград (1946).
10. В. П. Силин, *Введение в кинетическую теорию газов*, Наука, Москва, (1991).
11. Т. Л. Андреева, ЖЭТФ **54**, 641 (1968).
12. J. E. Moyal, Proc. Cambridge Phil. Soc. **45**, 100 (1949).
13. B. A. Lippman and J. Schwinger, Phys. Rev. **79**, 449 (1950).
14. А. С. Давыдов, *Теория атомного ядра*, Физматгиз, Москва (1958).